

Расчет поляризации для кристаллов типа АВО₃ методом функций Ваннье

Седенкова Ольга Игоревна

Гордиенко Алексей Болеславович

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

sedenkova.2015@mail.ru

Вычисление поляризации в кристаллах, в отличие от систем конечного размера, сталкивается с рядом трудностей, связанных с неоднозначностью выбора элементарной ячейки, а также фаз одночастичных функций. Одним из эффективных способов решения этой проблемы является использование базиса функций Ваннье, для которого выражение для поляризации может быть записано как

$$\mathbf{P} = \frac{e}{\Omega} \sum_i Z_i^{\text{ion}} \mathbf{R}_i^{\text{ion}} - \frac{e}{\Omega} \sum_n \bar{\mathbf{r}}_n, \quad (1)$$

где Ω - объем элементарной ячейки, $Z_i^{\text{ion}} \mathbf{R}_i^{\text{ion}}$ - заряд и положение ионов, $\bar{\mathbf{r}}_n$ - центр функции Ваннье [1]. Выражение (1) является эквивалентным выражению, полученному в рамках квантовой теории поляризации [2] и допускает возможность прямого расчета поляризации после определения набора функций Ваннье.

Целью настоящей работы является исследование электронной структуры кубической и тетрагональной фаз кристаллов BaTiO₃, PbTiO₃, KNbO₃ и определение спонтанной поляризации. Вычисления проводились в локальном приближении теории функционала плотности с использованием первопринципных псевдопотенциалов и базиса *double- ζ* псевдо-атомных орбиталей [3]. Для расчета функций Ваннье использовался метод [1]. В качестве примера на рис.2 приведена зонная структура кубического PbTiO₃, а также функции Ваннье. Значение поляризации для тетрагональной фазы PbTiO₃, полученное с помощью (1), составляет 0.900 C/м² и хорошо согласуется с результатами других работ: 0.888 C/м² [4], 0.936 C/м²

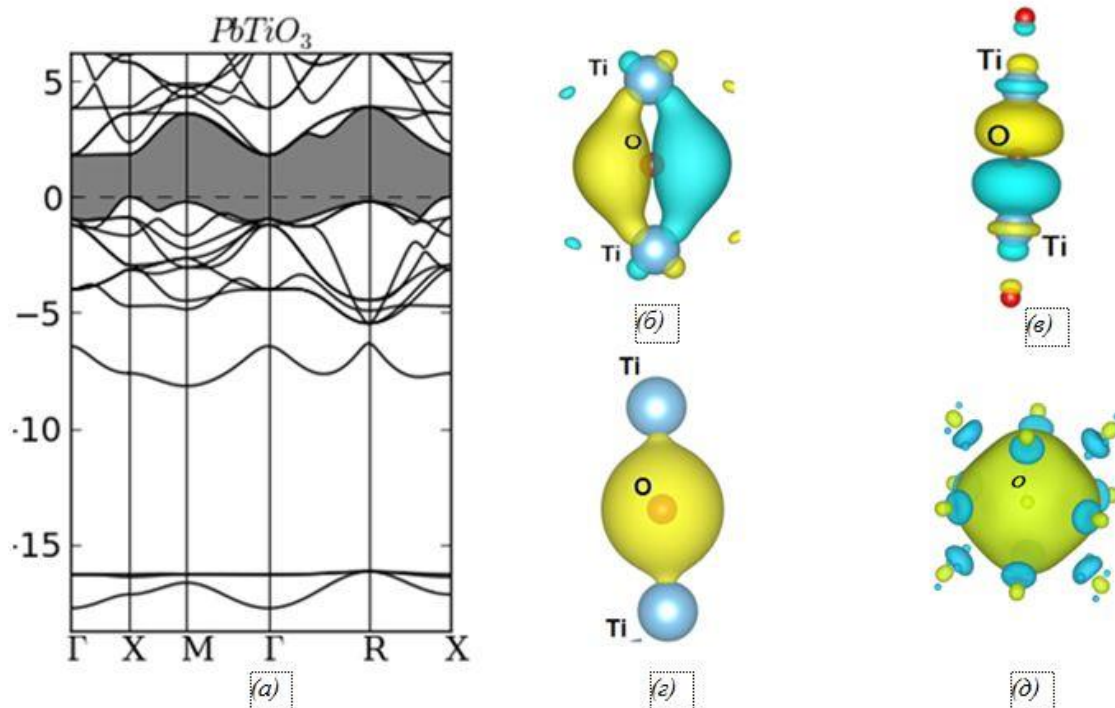


рис.1 Зонная структура кубической фазы PbTiO₃ и функции Ваннье (б-д) для различных способов выбора групп зон.

Список публикаций:

- [1] Marzari N., Vanderbilt D. // *Phys. Rev. B*. 1997. V.56. №20. P.12847.
- [2] R.D. King-Smith, D.Vanderbilt // *Phys. Rev. B*. 1993. V.47. №3. P.1651.
- [3] Гордиенко А.Б., Поплавной А.С. // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 1997, В.1. С.1.
- [4] Shi J., Grinberg I., Wang X., Rappe A. M. // *Phys. Rev.B*. 2014. V.89. P.094105
- [5] Nishida K., Kasai S., Tanaka K., Sakabu Y., Ishii F., Oguchi T. // *Jpn. J. Appl. Phys.* 2001. V.40. P.5806.